数理解析研究所講究録
269巻 1976年 55-69

固有方程式プログラムの信頼性テスト方式

阪大．大型センター　磯本征雄
後藤米子

1．序文

固有方程式プログラムがライブラリィとして登録されるようになり，数値計算に未熟な者にでも容易に固有値・固有ベクトルを得ることができるようになった．その反面，アルゴリズムの詳細を熟知しない者にでもプログラムを管理し，利用できるようなプログラムの信頼性を確認するテスト方式が必要になる．

あるライブラリィ・プログラムの利用者にとって，プログラムが信頼できるとは，望みの精度で解が得られることであり，また精度が望みのものより悪い場合でも必ずその事実を知り得ることであろう．我々の研究目的は，アルゴリズムの詳細に立入ることなくプログラムの信頼性をテストする方式を明らかにすることである．テストは，プログラムが正しく働くこと及び数値解誤差の振舞いに異常がないことを主

な着目点としておこなう． 但し，行列は実対称に限定する．

2．記号の定義

$n\times n$ 次元行列Aに対して，真の固有ベクトルと固有値 $(\vec{x}_i, \lambda_i)$, $i=1,2,\cdots,n$ は既知であるとする．

$$A\vec{x}_i = \lambda_i \vec{x}_i \; . \qquad (2.1)$$

但し，ここでは $|\vec{x}_i|=1$ と規格化するものと仮定する．

$(\vec{x}_i, \lambda_i)$ に対応する，被テストプログラムにより出力される数値解を $(\vec{x}_i', \lambda_i')$ とする． $(\vec{x}_i', \lambda_i')$ を n 組の $(\vec{x}_i, \lambda_i)$ を使って次のように展開する．

$$\lambda_i' = \lambda_i + \delta\lambda_i \; . \qquad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \vec{x}_i' &= (1-\delta_{/\!/}^i)\vec{x}_i + \delta_\perp^i \sum_{j\neq i} \alpha_{ij} \vec{x}_j , \\ &= \vec{x}_i + \delta\vec{x}_i , \quad i=1,2,\ldots,n . \end{aligned} \qquad (2.3)$$

$\delta\lambda_i$ は λ_i' の誤差である． $\delta\vec{x}_i$ は $\vec{x}_i'$ の誤差ベクトルである． $\delta_{/\!/}^i$ は $\delta\vec{x}_i$ の内のベクトル $\vec{x}_i$ に平行な成分の占める割合である． $\delta_\perp^i$ は $\delta\vec{x}_i$ の内のベクトル $\vec{x}_i$ に垂直な成分の占める割合である． また，α_{ij} は $\delta_\perp^i$ の内のベクトル $\vec{x}_j$ $(j\neq i)$ の成分の占める割合である．

テスト行列Aと固有値・固有ベクトルの全体との関係を見やすくするために，行列 Λ と X を導入する． Λ は，固有値

λ_i ($i=1, 2, \cdots n$) を対角要素とする対角行列である：

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix}. \tag{2.4}$$

Xは，固有ベクトル（列ベクトル）を要素とする行列である：

$$X = [\vec{x}_1, \vec{x}_2, \ldots, \vec{x}_n]. \tag{2.5}$$

X及びΛは次式を満す： $AX = X\Lambda$ (2.6)

テスト行列Aは，式(2.6)より $A = X\Lambda X^T$ により生成される。

式(2.2)と(2.3)におけるパラメター $\delta\lambda_i$, $|\delta\vec{x}_i|$, $\delta_{/\!/}^i$, $\delta_\perp^i$ 及びα_{ij}は，$(\vec{x}_i, \lambda_i)$ 及び $(\vec{x}_i', \lambda_i')$により次のようにして与えられる． まず式(2.2)と(2.3)より，次の関係を得る：

$$\delta\lambda_i = \lambda_i' - \lambda_i, \tag{2.7}$$

$$\delta\vec{x}_i = \vec{x}_i' - \vec{x}_i. \tag{2.8}$$

式(2.3)のベクトルの内積より，次式を得る：

$$\langle \vec{x}_i' \cdot \vec{x}_i' \rangle = (1 - \delta_{/\!/}^i)^2 + \delta_\perp^{i2} \sum_{j \neq i} \alpha_{ij}^2. \tag{2.9}$$

ここで，ベクトル $\sum_{j \neq i} \alpha_{ij} \vec{x}_j$ を1に規格化することにより，次式を得る：

$$\sum_{j \neq i} \alpha_{ij}^2 = 1 \tag{2.10}$$

一方，式(2.8)より，次の関係を得る：

$$|\delta\vec{x}_i|^2 = \delta_{/\!/}^{i2} + \delta_\perp^{i2}. \tag{2.11}$$

式(2.9)，(2.10)及び(2.11)より，次の関係を得る：

$$\delta_{/\!/}^i = \frac{1}{2}[1 + |\delta\vec{x}_i|^2 - \langle \vec{x}_i' \cdot \vec{x}_i' \rangle], \tag{2.12}$$

$$\delta_{\perp}^{i} = \sqrt{|\delta \vec{x}_i|^2 - \delta_{/\!/}^{i\,2}} \quad , \tag{2.13}$$

$$\alpha_{ij} = \langle \vec{x}_j \cdot \vec{x}_i \rangle / \delta_{\perp}^{i} \quad . \tag{2.14}$$

3．固有方程式数値解の誤差

固有方程式プログラムの信頼性テストの準備として，数値解誤差の定性的特徴を調べておく．

残差ベクトルの大きさ

$(\vec{x}_i, \lambda_i)$ の行列 A に対する残差ベクトル $\vec{\eta}_i$ は次式で与えられる．

$$\vec{\eta}_i = A\vec{x}_i - \lambda_i \vec{x}_i \quad . \tag{3.1}$$

数値解法の過程において，プログラム中では A, $\vec{x}_i$ 及び λ_i は既知である． ここで，計算機により実現可能な最小の相対誤差を ε とする． この時，相対誤差 ε の程度で式(3.1)右辺をゼロに近づけることは可能であろう． 行列 A の絶対値最大の固有値を λ_{max} とする． ここで，$\|A\|_2 \cong O(|\lambda_{max}|)$, $|\vec{x}_i| \cong 1 + o(\varepsilon)$ である． したがって $|A\vec{x}_i|$ の大きさは，$O(|\lambda_{max}|)$ である． 以上のことより，式(3.1)の左辺については，次の近似式を仮定する．

$$|\vec{\eta}_i| \cong o(\varepsilon \cdot |\lambda_{max}|) \quad . \tag{3.2}$$

このように，残差ベクトルは各々の $(\vec{x}_i, \lambda_i)$ に無関係に，ほぼ一定であろうことが予想される[1]．

固有値の分布と誤差

固有値の分布状況は固有値・固有ベクトルの誤差に大きく影響する.[2)] 以下，このことを調べる. 式(3.1)の左より $\vec{x}_j^T$ を掛けて次式を得る.

$$\langle \vec{x}_j \cdot \vec{\eta}_i \rangle = (\lambda_j - \lambda'_i) \cdot \langle \vec{x}_j \cdot \vec{x}'_i \rangle . \qquad (3.3)$$

式(3.3)において $j=i$ とすれば，次式を得る.

$$|\delta\lambda_i| = |\langle \vec{x}_i \cdot \vec{\eta}_i \rangle / \langle \vec{x}'_i \cdot \vec{x}'_i \rangle| .$$

$\langle \vec{x}_i \cdot \vec{x}'_i \rangle = 1 + o(\varepsilon)$ であり，$\langle \vec{x}_i \cdot \vec{\eta}_i \rangle = o(\varepsilon \cdot |\lambda_{max}|)$ であることから，次の結果を得る.

$$|\delta\lambda_i| = o(\varepsilon \cdot |\lambda_{max}|) . \qquad (3.4)$$

式(3.3)に対して式(2.3)を代入して，次式を得る.

$$\delta_{\perp}^{i\,2} = \sum_{j \neq i} \langle \vec{x}_j \cdot \vec{\eta}_i \rangle^2 / (\lambda_j - \lambda'_i)^2 ,$$

$$\delta_{/\!/}^{i\,2} = [\,1 - \langle \vec{x}_i \cdot \vec{\eta}_i \rangle / (\lambda_i - \lambda'_i)\,]^2 .$$

この2式と式(2.11)より，$|\delta\vec{x}_i|$ に対して次の関係を得る.

$$|\delta\vec{x}_i|^2 = \left[1 - \frac{\langle \vec{x}_i \cdot \vec{\eta}_i \rangle}{(\lambda_i - \lambda'_i)}\right]^2 + \sum_{j \neq i} \frac{\langle \vec{x}_j \cdot \vec{\eta}_i \rangle}{(\lambda_j - \lambda'_i)^2} . \qquad (3.5)$$

式(3.2)及び式(3.4)より $|\langle \vec{x}_i \cdot \vec{\eta}_i \rangle / (\lambda_i - \lambda'_i)| = 1 + o(\varepsilon)$. 故に式(3.5)の第1項は一般に $o(\varepsilon)$ の大きさである. 但し，固有値の誤差 $\delta\lambda_i$ が異常に大きくなれば $|\delta\vec{x}_i|$ も大きくなるであろう. 第2式は，λ'_i に近接する固有値が存在する時，$|\delta\vec{x}_i|^2$ が大きくなることを示している.[2)]

残差ベクトルと丸め誤差の累積

以上の議論では，行列Aは初期状態のままであり，数値計算の過程で入る丸め誤差の累積効果は無視されている． ところが現実には，数値解を計算する過程で行列Aは何回も変換される． そしてその度に丸め誤差が累積される． この結果，数値解($\tilde{x}_i, \tilde{\lambda}_i$)が計算される時点での行列は，すでに誤差 δA_i だけ加わった行列A'になっている：

$$A'_i = A + \delta A_i . \qquad (3.6)$$

δA_i を丸め誤差累積効果の大きさを調べるための手掛りとして使う．

A'_iは，次の関係を満す．

$$A'_i \tilde{x}_i = \tilde{\lambda}_i \tilde{x}_i . \qquad (3.7)$$

式(3.7)より，式(3.6)を用いて次式を得る．

$$\delta A_i \cdot \tilde{x}_i = (\tilde{\lambda}_i - A)\,\tilde{x}_i . \qquad (3.8)$$

ここで，$-\delta A_i \cdot \tilde{x}_i$ は残差ベクトルである． 式(3.8)をベクトル$\tilde{x}_i$と $\sum_{j\neq i} \alpha_{ij} \tilde{x}_j$ の成分に分解して，次の関係式を得る．

$$E^i_{/\!/} = \langle \tilde{x}_i \cdot \delta A_i \tilde{x}_i \rangle = (\tilde{\lambda}_i - \lambda_i)(1 - \delta^i_{/\!/}) . \qquad (3.9)$$

$$E^i_{\perp} = \langle \sum_{j\neq i} \alpha_{ij} \tilde{x}_j \cdot \delta A_i \tilde{x}_i \rangle = \delta^i_{\perp} \sum_{j\neq i} \alpha_{ij}^2 (\tilde{\lambda}_i - \lambda_j) . \qquad (3.10)$$

式(3.9)及び(3.10)は，行列Aの誤差の大きさを示す． 但し，これらは演算の繰り返しのための丸め誤差累積効果のほかに，入力時点でのAの誤差をも含んでいる．

4．アルゴリズムに関するテスト方式

アルゴリズムのテストでは，プログラムの総ての部分を駆使する必要がある． すなわち，テスト行列Aとしては，様々の異る性質を備えた行列を使わなければならない． ところが行列Aの性質は，その固有ベクトルX及び固有値Λの面から見ることができる．

さて，固有値λ_iに注目する時，その性質を次の場合に分類できる．

1)．λ_iは最小固有値である．
2)．λ_iは他の固有値と縮退している．
3)．λ_iは最大固有値でも最小固有値でもない．　(4.1)
4)．λ_iは最大固有値である．

1)～4)のいずれも，3次元行列Aにより実現でき，したがって固有値の様々の性質に関するテストは3次元空間内で充分である． 固有ベクトルは，正規直交性以外に制約条件は考えられない． したがって固有ベクトルの様々の性質に関しても，3次元空間以上の次元でテストする積極的理由はない． 故に我々は3次元行列Aをテスト行列とする．

実対称行列Aの固有値・固有ベクトルは実数及び実ベクトルである． すなわちΛは次式で与えられる．

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}. \qquad (4.2)$$

固有ベクトルは回転行列[3]を使って次式で与えられる．

$$X = \begin{bmatrix} \cos\theta\cos\varphi\cos\psi - \sin\varphi\sin\psi & \cos\theta\sin\varphi\cos\psi + \cos\varphi\sin\psi & -\sin\theta\cos\psi \\ -\cos\theta\cos\varphi\sin\psi - \sin\varphi\cos\psi & -\cos\theta\sin\varphi\sin\psi + \cos\varphi\cos\psi & \sin\theta\sin\psi \\ \sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \end{bmatrix} \qquad (4.3)$$

オイラー角(θ,φ,ψ)を適当な制約条件の下で変えてゆくことにより，任意のXを機械的に生成できる． テスト行列Aは，Λ及びXより次式で生成する：　$A = X\Lambda X^T$. (4.4)

テストは，固有ベクトル・固有値の内の1つ$(\bar{x}_i, \lambda_i)$に注目し，$(\bar{x}_i, \lambda_i)$の変化とこれに対する誤差の大きさ$\delta_{\parallel}^{i}$, $\delta_{\perp}^{i}$，$|\delta\bar{x}_i|$, $|\delta\lambda_i|$及び以下の量を測定することにより行なわれる．

$(\bar{x}_i, \bar{\lambda}_i)$は，次の近似式を満す． 但し，誤差は$o(\varepsilon\cdot|\Lambda_{max}|)$.

$$A\bar{x}_i \cong \bar{\lambda}_i \bar{x}_i . \qquad (4.5)$$

さて，ベクトル$A\bar{x}_i$と$\bar{\lambda}_i\bar{x}_i$の方向余弦は次式で与えられる．

$$\cos\Omega = \langle \bar{x}_i \, A\bar{x}_i \rangle / \sqrt{\langle \bar{x}_i \cdot \bar{x}_i \rangle \cdot \langle \bar{x}_i \cdot A^2 \bar{x}_i \rangle}$$

$$= \frac{(1-\delta_{\parallel}^{i})^2 \lambda_i + \delta_{\perp}^{i2} \sum_{j\neq i} \alpha_{ij}^2 \lambda_j}{\sqrt{[(1-\delta_{\parallel}^{i})^2 + \delta_{\perp}^{i2}][(1-\delta_{\parallel}^{i})^2 \lambda_i^2 + \delta_{\perp}^{i2} \sum_{j\neq i} \alpha_{ij}^2 \lambda_j^2]}} . \qquad (4.6)$$

また，ベクトル$A\bar{x}_i$と$\bar{\lambda}_i\bar{x}_i$の長さの差は次式で与えられる．

$$f_i = |\langle \bar{x}_i \, A^2 \bar{x}_i \rangle^{1/2} - \langle \bar{x}_i \cdot \bar{\lambda}_i^2 \bar{x}_i \rangle^{1/2}| ,$$

$$= |[(1-\delta_{\parallel}^{i})^2 \lambda_i^2 + \delta_{\perp}^{i2} \sum_{j\neq i} \alpha_{ij}^2 \lambda_j^2]^{1/2} - |\bar{\lambda}_i| [(1-\delta_{\parallel}^{i})^2 + \delta_{\perp}^{i2}]^{1/2}| . \qquad (4.7)$$

もし，プログラムにおける処理が理想的に進められているならば，式(3.2)の仮定から我々は次の関係を期待できる．

$$\Omega \lesssim \varepsilon , \qquad f_i \lesssim \varepsilon \cdot |\lambda_{max}| . \tag{4.8}$$

テスト結果の評価に当って，テスト行列Aの特性に依存する事項とプログラムの特性に依存する事項を区別しなければならない． $\delta_\perp^i$，$\delta_\parallel^i$，$|\delta\tilde{x}_i|$，$|\delta\lambda_i|$等は，行列Aの性質に依存する． 上記議論に見るようにΩ及びf_iは行列Aの性質に直接関係しない，プログラムの性質に依存する量である． 以下，具体例により説明する．

図1は，閾ヤコビ法によるプログラムを，浮動小数点実数有効桁数約10桁の計算機で調べたテスト結果である． X及び$\lambda_2=0.9$，$\lambda_3=1.1$を固定し，λ_1を$0.1\sim10$の範囲で変化させた時の$|\delta x_1|$，$|\delta\lambda_1/\lambda_1|$，$f_1$，$\sqrt{1-\cos\Omega}$の変化の様子が示されている． 横軸は$\lambda_1$の値である． $\lambda_{max}=1.1$であることより，$|\delta\lambda_1/\lambda_1|$はほぼ$10^{-10}$程度の大きさになっている． $\lambda_1\approx0.9$及び≈1.1において$|\delta\tilde{x}_1|$が大きくなっているのは，式(3.5)第2項による． 一方$|f_1|$及び$\sqrt{1-\cos\Omega}\approx\Omega/\sqrt{2}$が，$10^{-10}$程度の大きさにおさえられている事より，プログラムが理想的に働いたことを示しているといえよう．

5．丸め誤差累積効果に関するテスト方式

丸め誤差の累積効果は，計算の手間に由来する．　したがって，このためのテストには或る程度大きな次元数の行列を使う必要がある．　そして，アルゴリズムのテストのように多数の行列を系統的に生成しこれを解く方法は適さない．

誤差累積効果を見る一方法として，計算の手間の異る，しかも同じ固有値・固有ベクトルをもつ２行列を解いて，その誤差 $|\delta\lambda_i|$, $|\delta\tilde{x}_i|$, $E^i_{/\!/}$ 及び $E^i_{\perp}$ の差異を比較する．　この場合にもＸ及びΛの２面から見る．

Λには，その中の固有値の分布の状態，大小の順序とΛ内の位置との関係等により，いく通りかのものが考えられる．また，定数倍等の，本来数学的に重要でない操作が，はたしてプログラムにおいても敏感な影響を受けないか否かも調べる必要がある．

Ｘは，行列Ａを対角行列Λに変換するための変換行列としての意味をもつ．　固有方程式解法の手間は，この変換行列Ｘを得るための繰り返し操作と考えて良いであろう．　一方，$A = X\Lambda X^T$ であり，もしＸが単位行列ならＡは対角行列となり，行列Ａの数値解法上の手間はほとんどかからないであろう．　Ｘが単位行列にくらべて「複雑」な構造をもつならば，その程度に応じてＡも対角行列から遠ざかり計算の手間もかかるであろう．　但し，「複雑」な構造及び計算の手

向の意味は，解法アルゴリズムにも依存するであろうから，必ずしも自明ではない．　この点に関しては未解決である．

以下，具体的テスト例で説明する．　テストは，図1と同じ職ヤコビ法のプログラムに対して行った．　固有値は大から小へ定数倍づつ減少する．　Xは，単位行列から出発して，任意の2ベクトルのなす平面内の回転を次のベクトルの組合せ順序で次々と繰り返して得られた．

<u>才1の場合</u>

$$
\begin{array}{l}
(1,2),\ (1,3),\ (1,4),\ \ldots,\ (1,n-1),\ (1,n) \\
\qquad (2,3),\ (2,4),\ \ldots,\ (2,n-1),\ (2,n) \\
\qquad\qquad \ldots \\
\qquad\qquad (n/2,n-1),\ (n/2,n)
\end{array}
\tag{5.1}
$$

<u>才2の場合</u>

$$
\begin{array}{l}
(n,n-1),\ (n,n-2),\ (n,n-3),\ \cdots,\ (n,2),\ (n,1) \\
\qquad (n-1,n-2),(n-1,n-3),\ \cdots,\ (n-1,2),\ (n-1,1) \\
\qquad\qquad \ldots \\
\qquad\qquad (\frac{n-2}{2},2),(\frac{n-2}{2},1)
\end{array}
\tag{5.2}
$$

才1と才2の場合の違いは，行列Xへの変換の手間が左上と，右下に集中している点である．

図2及び3には，式(5.1)と(5.2)のXに対するテスト結果を示す．　横軸は$\log\lambda_i$である．　図2には各λ_i $(i=1,2,\cdots,50)$

に対する$|\delta\lambda_i/\lambda_i|$と$|\delta\tilde{\lambda}_i|$を示した．図3には，同じく$E_i$を示した．図2と3より，式(3.4),(3.5)の傾向，テスト行列の差異による誤差の微妙な差異，アルゴリズムとδA_iの大きさ等，様々のものを読み取ることができる．

6．まとめ

アルゴリズムに関するテスト方式は，一応完了した．丸め誤差累積効果に関するテスト方式については，未だ研究を進めている段階である．特に，X及びΛの与え方と，この結果できる行列Aの「複雑さ」や計算の手順との関係については，様々のアルゴリズムの可能性を踏えた上で，定性的・定量的に明らかにしなければならないと考えている．

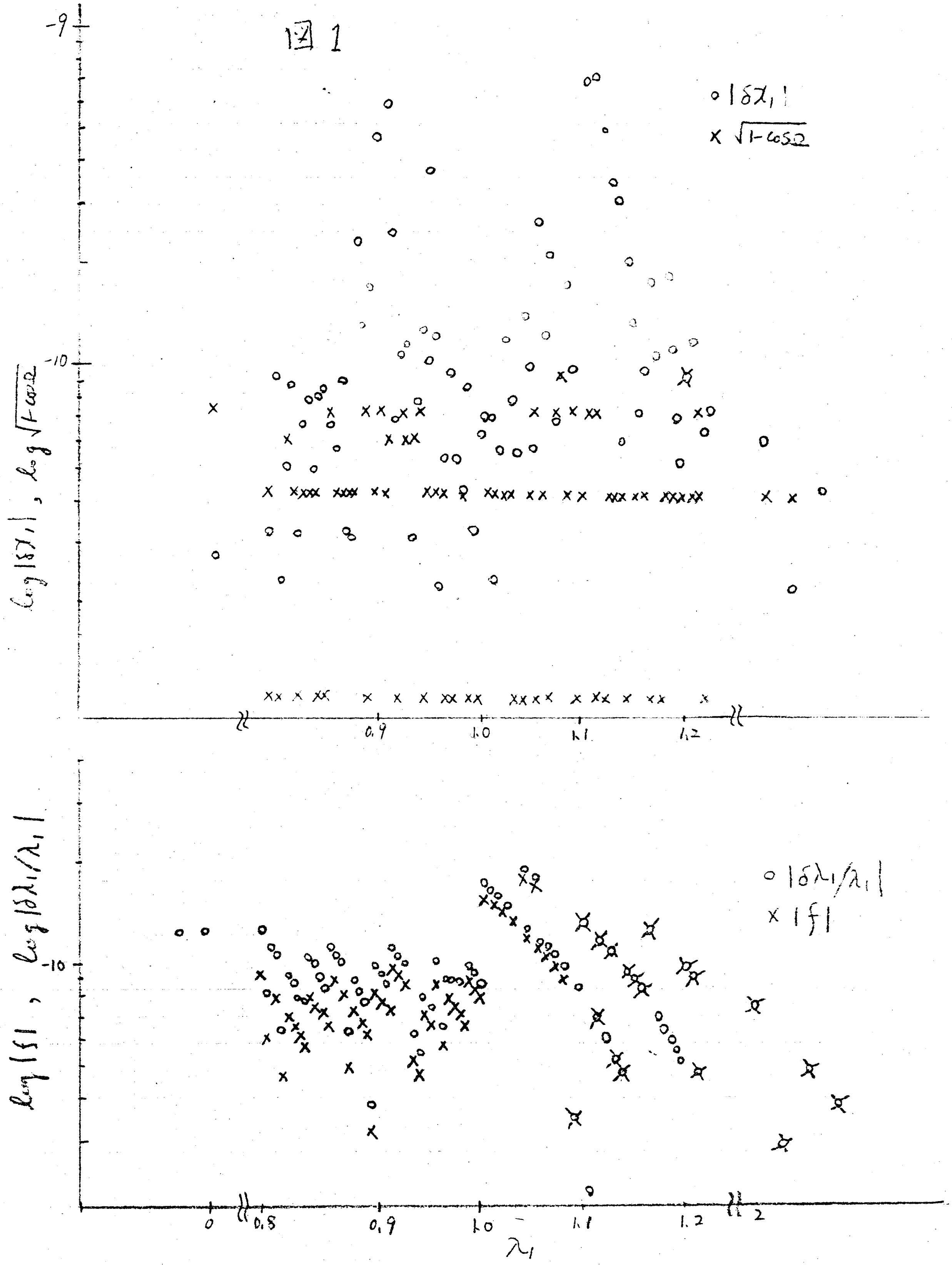
参考文献

1)．J.H.ウィルキンソン著／一松 信，四条忠雄 訳；基本的演算における丸め誤差解析，培風館 (1974)．

2)．遠山 啓；行列論，共立全書 (1960)

3)．山内恭彦；回転群とその表現，岩波書店 (1973)

図 1


-9
-10
$\log|\delta\lambda_1|$, $\log\sqrt{1-\cos\Omega}$
o $|\delta\lambda_1|$
x $\sqrt{1-\cos\Omega}$
0.9
1.0
1.1
1.2
-10
$\log|f|$, $\log|\delta\lambda_1/\lambda_1|$
o $|\delta\lambda_1/\lambda_1|$
x $|f|$
0
0.8
0.9
1.0
1.1
1.2
2
λ_1

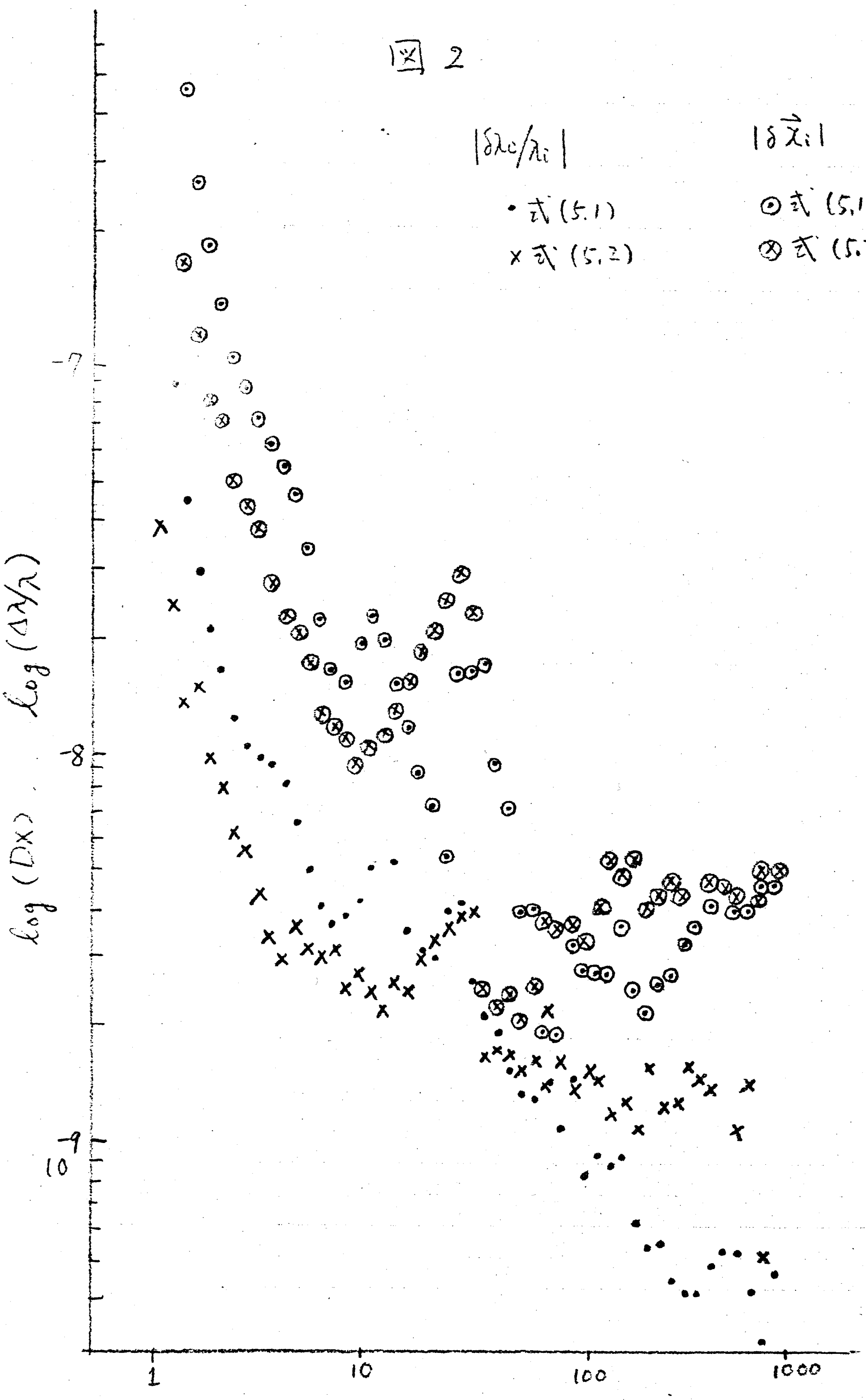
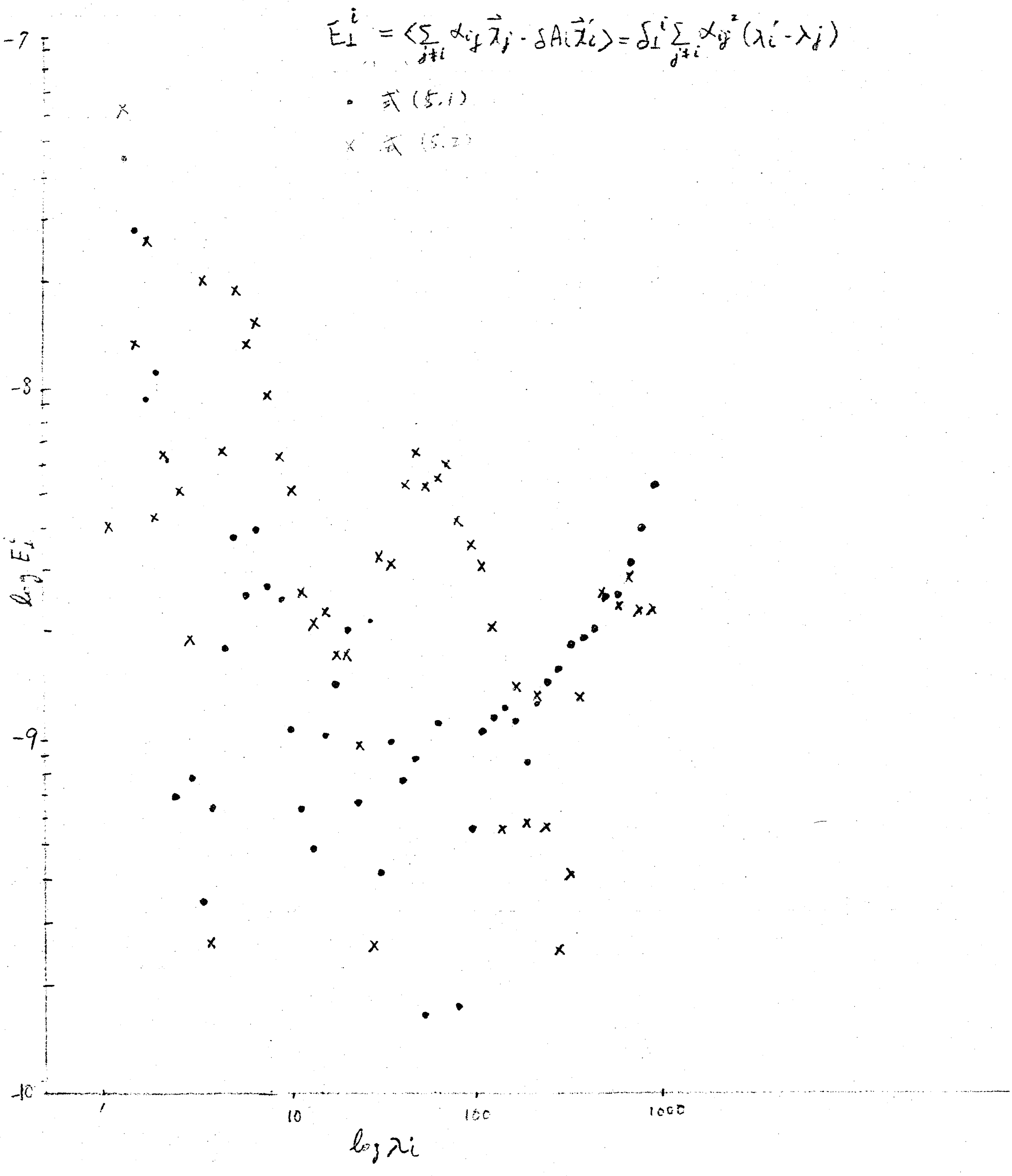


図 2
$|\delta\lambda_c/\lambda_i|$
$|\delta\vec{x}_i|$
• 式 (5.1)
× 式 (5.2)
⊙ 式 (5.1)
⊗ 式 (5.2)
$\log(Dx)$, $\log(\Delta\lambda/\lambda)$
-7
-8
10^{-9}
1
10
100
1000

図3


$E_{\perp}^{i} = \langle \sum_{j\neq i} \alpha_{ij} \vec{\lambda}_j \cdot \delta A_i(\vec{\lambda}_i) \rangle = \delta_{\perp}^{i} \sum_{j\neq i} \alpha_{ij}^2 (\lambda_i - \lambda_j)$
• 式(5.1)
× 式(5.2)
-7
-8
-9
-10
1
10
100
1000
$\log E_{\perp}^{i}$
$\log \lambda_i$